



TITLE:

Particle-Hole Conjugation

AUTHOR(S):

渡辺, 宏

CITATION:

渡辺, 宏. Particle-Hole Conjugation. 物性研究 1965, 3(4): 193-199

ISSUE DATE:

1965-01-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/85657>

RIGHT:

Particle - Hole Conjugation

渡 辺 宏 (北大理)

(12月4日受理)

§ 1 はじめに

同種の Fermi 粒子の集団を記述する際、粒子そのものに着目する代りに、粒子の抜けた穴に着目した方が簡単なことがある。又、1 粒子の量子状態の集合を適当に 2 つに分類して、その集合の 1 つは粒子に、他は穴に着目するのが都合のよいこともある。

このノートでは、粒子と穴の使い分けについて、occupation number 表示を用いて述べてみる。§ 2 以下では、実際の定式化は粒子に着目して行こう。occupation number 表示を扱うには、粒子の creation と annihilation の operator を用いるのが便利である。1 つの粒子を j という状態に創る operator を a_j^+ 、 K という状態にある粒子を消す operator を a_K と記すことにする。 a_j^+ と a_j とは互に hermitian conjugate である。これら a_j^+ 、 a_K などについて次の交換関係が成立する。

$$a_j^+ a_K + a_K a_j^+ = \delta_{jK} \quad (1)$$

$$a_j^+ a_K^+ + a_K^+ a_j^+ = 0 \quad (2)$$

$$a_j a_K + a_K a_j = 0 \quad (3)$$

$a_j^+ a_j$ という operator は j という状態にある粒子数に対応する即ち

$$a_j^+ a_j = n_j \quad (4)$$

と書く。(1)から

$$a_j a_j^+ = 1 - n_j \quad (5)$$

j という状態にある粒子を消すことは穴を j に創ることであり、 K という状

渡辺 宏

態に粒子を創ることは、 K にある穴を消すことである。粒子と穴に関する creation と annihilation の operator を別々の記号で定義し、議論を別々に定式化して結果を物理的に解釈するという話の進め方もあるが、解釈にアイマイさが残る場合がある。例えば、電子の磁気能率は正孔では向きが逆になるか？ といった疑問である。そこで § 2 以下ではもう少し立ち入った約束を定義し、粒子に関する operator のめで定式化を進める。

§ 2 Shell

考えている Fermi 粒子の 1 粒子の Hamiltonian H が時間反転 (Wigner の意味) に対して不変であるとする。その場合、Kramers の定理によつて、1 粒子の状態 j と、その時間反転した 1 粒子の状態 T_j とは同じエネルギーに縮退している。ここで T_j という状態は j の量子数の中で、時間反転で符号を変える operator に関係する量子数の符号を逆にして得られるものとする。

H がある変換の群に対して不変の場合は、その群に特徴的な必然的な縮退が生ずる。これは due degeneracy とよばれている。時間反転と変換群に伴つて縮退している 1 粒子の状態の集合を “Shell” と定義する。1 つの Shell に属する状態の数を N とすると、 N は常に偶数である。

時間反転で関係つけられる j と T_j の状態ベクトル $|j\rangle$ と $|T_j\rangle$ は時間反転の operator K で次の式で関係つけられるとする。

$$K|j\rangle = \epsilon_j |T_j\rangle, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (6)$$

ここで位相因子 ϵ_j は絶対値 1 で、 K^2 の 1 粒子状態に関する固有値が -1 であるから

$$\epsilon_j^* \epsilon_{T_j} = -1 \quad \text{又は} \quad \epsilon_j = -\epsilon_{T_j} \quad (7)$$

なる関係を満足しなければならない。例えば

$$\epsilon_j = -\epsilon_{T_j} = 1 \quad \text{又は} \quad -i \quad (8)$$

のように選んでもよい。

§ 3 Complementary states

N 個の 1 粒子状態から成る 1 つの Shell を考えよう。この Shell に n 個の粒子が存在する系と、 n 個の穴 (或いは $N - n$ 個の粒子) が存在する系とは、種々の点で類似している。例えば n 粒子系の波動函数と n 穴系の波動函数とか、又、行列要素や固有値などが極めて類似している場合がある。この類似性を見通しよく安定化するために complementary state という概念を導入する。 n 個の 1 粒子状態 j, k, \dots, n が粒子により占められている状態 $\varphi(j, k, \dots, n)$ と、 N 個の 1 粒子状態から T_j, T_k, \dots, T_n を除いた $N - n$ 個が粒子によつて占められている状態 $\varphi([T_j, T_k, \dots, T_k])$ を互に complementary な状態と呼ぶ。(或いは conjugate な状態。) 例えば shell に 1 つも粒子のない状態と、 N 個ある状態とは complementary である。この complementary な状態を、位相因子を含めて、一意に関係つける operator C を次の様に定義する。

$$C|0\rangle = \epsilon_1 \epsilon_2 \dots \epsilon_N a_1^+ a_2^+ \dots a_N^+ |0\rangle \quad (9)$$

及び

$$C a_j^+ C^{-1} = \epsilon_j^* a_{T_j} \quad , \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (10)$$

ここで $|0\rangle$ は粒子が 1 つもない状態、 $|N\rangle$ は N 個ある状態の状態ベクトルである。便宜上、 $1, 2, \dots, N$ という名前は、 j 番目を時間反転した状態が $N - j + 1$ 番目になるように約束してある。例えば $T_1 = N$ 。

(9) 式の位相因子の積 $\epsilon_1 \epsilon_2 \dots \epsilon_N$ は C の時間反転に対する不変性と、 C^2 の固有値を以下に求めるために導入した。このような C が unitary であることは容易に示される。

(10) の hermitian conjugate をとると

$$C a_j C^{-1} = \epsilon_j a_{T_j}^+ \quad (11)$$

(7) を考慮して

$$C^2 a_j^+ C^{-2} = -a_j^+ \quad (12)$$

渡辺 宏

C^2 を $|0\rangle$ に作用すると

$$C^2|0\rangle = C C C^{-1} C|0\rangle = (-1)^{N/2} |0\rangle \quad (13)$$

C^2 を n 粒子の状態 $|n, r\rangle$, r は量子数の組、に作用すると

$$C^2|n, r\rangle = (-1)^{N/2-n} |n, r\rangle. \quad (14)$$

ここで (12), (13) 式を用いた。(13)(14) から C^2 の固有値は $(-1)^{N/2-n}$ で与えられるから

$$C^2 = (-1)^{N/2-\underline{n}} \quad (15)$$

と書ける。ここで \underline{n} は粒子数 operator で

$$\underline{n} = \sum_{j=1}^N a_j^+ a_j.$$

特に $n = N/2$ の時は

$$C^2 = 1 \quad (16)$$

となり、 $|N/2, r\rangle$ 又は -1 になるように出来る可能性を示している。このような選び方として seniority scheme を挙げることが出来るが、ここでは立ち入らない。量子数の組 r の内、物理的に観測される量に関係するものは、 C と可換な operator の固有値になつているものとする。次節で示すが、例えば 1 粒子型の operator であれば時間反転で符号を変えるものということになる。

§ 4 Operator の分類

1 粒子型 operator F は shell の中で、次の様に表わされる。

$$F = \sum_{j,K} \langle j | f | K \rangle a_j^+ a_K \quad (17)$$

2 粒子型 operator G は

$$2G = \sum_{j,K,l,m} \langle jK | g | lm \rangle a_j^+ a_K^+ a_l a_m \quad (18)$$

但し和は shell 中の N 個の 1 粒子状態について行う。又 $\langle jK | g | l m \rangle = \langle K_j | g | m l \rangle$.

F が hermitian か anti-hermitian, 又、時間反転で符号を変えるか変えないか、に従つて、 C との交換関係は 表 1 のように与えられる。

表 1

時間反転 に対して	エルミート	反エルミート
不変	$CF = -FC$	$CF = FC$
符号変る	$CF = FC$	$CF = -FC$

この表では scalar operator, 即ち H を不変にする群に関しても時間反転に対しても不変な 1 粒子型 operator は除いてある。このような operator は \underline{n} に比例することが容易に群論から知れる。

例えば $|n, r\rangle$ が角運動量の固有状態であれば $C|n, r\rangle$ もそうで、同じ固有値に属することになる。磁気能率は C と可換で、その向きは $|n, r\rangle$ と $C|n, r\rangle$ に関して同じとなる。

G については、一般には表 1 のような簡単な関係は得られないが

$$C G C^{-1} = G_0 + G_1 + G \quad (19)$$

のように書かれる。ここで G_0 は定数, G_1 は 1 粒子型 operator. もし G が表 1 のいずれかの F の積の形に与えられれば

$$C G C^{-1} = G \quad (20)$$

となる。

もし (19) において G が scalar であれば G_1 は \underline{n} に比例する。

任意の operator O の $(N-n)$ 粒子 (即ち n 穴) の状態に関する行列要素は

$$\langle N-n, r' | O | N-n, r \rangle = \langle n, r' | C^{-1} O C | n, r \rangle \quad (21)$$

と書けるから、 $C^{-1} O C$ の n 粒子の状態 $|n, r\rangle$ に関する行列要素を計算すれば

渡辺 宏

ばよいことになる。 $N-n$ が n よりもはるかに大きい時は、(21)の関係は

$(N-n)$ 粒子系の計算を簡単にするのに役に立つ。 $N-n$ が n に等しい時、即ち $n = N/2$ の時は、そのような簡単化の代りに、有用な selection rule が § 5 のように得られる。

§ 5' $n = N/2$ の場合

$n = N/2$ の場合、 $|N/2, r\rangle$ という状態を C の固有値に従つて2種類に分けることが出来ることを § 3 で述べた。 C の固有値が $+1$ の状態を even, -1 である状態を odd と呼ぶことにする。

2粒子型の operator G が scalar の時は $n = N/2$ の場合、(19)を C で再び変換して

$$G = G_0 + G_1 + C G C^{-1} \quad (22)$$

となる。ここで $C G_1 C^{-1} = G_1$ になることを用いた。理由は $C \underline{n} C^{-1} = \underline{n}$ となるから、(19)と(22)を比べて

$$G_0 + G_1 = 0$$

となり

$$C G C^{-1} = G \quad (23)$$

を得る。即ち、scalar な G は $n = N/2$ の場合 C と可換である。それ故 G についての Selection rule

$$\langle N/2, r', \text{even} | G | N/2, r, \text{odd} \rangle = 0 \quad (24)$$

をうる。そして G の固有状態はやはり C に関して even と odd の二種になる。

次に、 C と可換な F を even, 反可換な F を odd と呼ぶと次の selection rule をうる。

$$\langle N/2, r', \text{even} | F_{\text{odd}} | N/2, r, \text{even} \rangle = 0 \quad (25)$$

$$\langle N/2, r', \text{odd} | F_{\text{even}} | N/2, r, \text{even} \rangle = 0 \quad (26)$$

§ 6 2つのShell の場合

2つのShell I 及び II を考える場合は、夫々のShell について C_I, C_{II} を(9), (10)に従って定義するとよい。

例えばI については粒子に、II については穴に着目する時は、 C_{II} のみを用いて、2つのShell の中で定義されたoperator O の行列要素について次の関係をうる。

$$\begin{aligned} \langle n_I, N_{II} - n_{II}, r' | O | n_I, N_{II}, r \rangle \\ = \langle n_I, n_{II}, r' | C_{II}^{-1} O C_{II} | n_I, n_{II}, r \rangle \end{aligned} \quad (27)$$

2つ以上のShell への拡張は自明である。

§ 7 む す び に

以上の話では具体例を挙げなかつたけれど、実際に応用する際には、Shell を定義するHamiltonian を不変にする群，1粒子状態の時間反転に伴う位相因子 ϵ_j の選び方， $|n, r\rangle$ の r の選び方，といった作業が必要である。又、粒子数を変えるようなoperator の行列要素など述べなかつたが、例えばproton とneutron を変換するようなHamiltonian が現れる場合には C の定義を拡張する必要がある。